

ФАЗОВЫЙ И ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ПОКРЫТИЯ ПОСЛЕ ЕГО НЕРАВНОВЕСНОЙ ОБРАБОТКИ КОМБИНИРОВАННЫМ ПОТОКОМ ИОНОВ

Букрина Н.В.

Руководитель – профессор, д.ф.-м.н. Князева А.Г.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
e-mail: bookr@mail.ru

В настоящее время на основе TiN разрабатывается новый класс покрытий – нанокомпозитные со средним размером зерен менее 100 нм, в частности, двухфазные покрытия на основе нитридов титана и алюминия [1–3]. Вследствие значительного увеличения объемной доли границ раздела такие покрытия проявляют в ряде случаев уникальное сочетание свойств: высокую твердость, износостойкость, окислительную стойкость и одновременно высокий коэффициент упругого восстановления, и низкий коэффициент трения. С помощью бомбардировки пучками ионов высокой энергии можно синтезировать покрытия с изменяющимся по глубине структурно-фазовым составом или так называемые градиентные покрытия [4]. Экспериментальные исследования структуры покрытия после обработки не дают полного представления о том, какие процессы привели к образованию той или иной структуры. В этом случае помощь может оказать математическое моделирование. Моделирование технологического процесса и его стадий необходимо и с целью дальнейшей оптимизации технологии, выбора технологических параметров. В настоящей работе исследуется математическая модель процесса модификации поверхностного слоя покрытия комбинированным потоком ионов.

Математическая модель процесса ионной модификации материала (Fe) с «толстым» покрытием (TiN) комбинированным потоком ионов ($Al+B$) сформулирована в [5-7] и соответствует рис. 1.

Рис. 1. Условная схема процесса ионной модификации покрытия

При формулировке модели учтено, что процессы теплопроводности и диффузии обладают существенно

различными пространственными и временными масштабами, так что уже на начальной стадии процесса обработки поле температуры в материале можно считать однородным: выравнивание температуры теплопроводностью происходит много быстрее, чем нагрев поверхностного слоя за счет энергии ионов, и тем более быстрее, чем диффузионное перераспределение элементов.

Некоторые параметры химических элементов, принятые в расчетах, представлены в таблице 1.

Таблица 1

Некоторые параметры химических элементов [8, 9]

элемент	Ti	N	Al	B
---------	------	-----	------	-----

,	47,88	14	26,98	10,8
,			0,1	
,	123	75	128	260

Каждый расчет дает полную информацию о динамике процесса распределения концентраций «чистых» элементов и химических соединений, а также фазовый и химический состав покрытия в конце процесса обработки.

В качестве примера на рис. 2, а, б представлено пространственное распределение молярных концентраций Ti, образование TiV и распределение компоненты тензора напряжений в покрытии в различные моменты времени.

а)

б)

Рис. 2. Пространственное распределение элементов и соединений в последовательные моменты времени 2 (1), 150 (2), 600 (3), 1000 (4), 1500 (5) а), б),

Увеличение энергии активации реагирующих веществ на 10% (рис. 2, б) практически не сказывается на распределении чистых элементов и образовании химических соединений. Различие заметно лишь для реакции образования TiV, где к моменту времени 1000 с. происходит ускорение реакции в том месте, где имеется максимум внедряемых ионов.

Это связано с тем, что основные процессы, определяющие свойства покрытий, возникающие при обработке внешним источником энергии, происходят в так называемом активированном слое. Формирование активированного слоя сопровождается интенсивными процессами нагрева и закалки, тепло- и массопереноса, формированием неравновесных и фазовых состояний. Это проявляется, например, в ускорении диффузионных процессов в активированном слое [10, 11]. Поэтому, литературные данные мало подходят для задач такого типа, так как не соответствуют реальной ситуации.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 06-08-96919-р_офи.

Литература

1. PalDey S., Deevi S.C. // Materials Science and Engineering. 2003. A 342. P. 58 – 79.
2. Veprek S., Veprek-Heijman M.G.J., Karvankova P. et al. // Thin Solid Films. 2005. V.476. P. 1-29.
3. Сергеев В.П., Федорищева М.В., Сергеев О.В. и др. // Перспективные материалы. 2006. №1. С. 73-78.
4. Shozo Inoue, Hitoshi Uchiha, Kazuyoshi Takeshita et al. // Thin Solid Films. 1995. V.261. P.115-119.

5. Букрина Н. В., Князева А. Г., Сергеев В. П. // сборник научных трудов Российской школы-конференции молодых ученых и преподавателей «Биосовместимые наноструктурные материалы и покрытия медицинского назначения». 25 сентября-1 октября, Белгород, Россия.-2006.-с. 319-323
6. Букрина Н. В., Князева А. Г. // Материалы III Российской научно-технической конференции РАЗРУШЕНИЕ, КОНТРОЛЬ И ДИАГНОСТИКА МАТЕРИАЛОВ И КОНСТРУКЦИЙ (Электронный ресурс) Екатеринбург, ИМАШ УрО РАН, 2007. Электронный оптический диск, <http://www.imach.uran.ru/conf/rkd/index.htm>
7. Букрина Н. В., Князева А. Г., Сергеев В. П. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009. № 1. с. 1–10.
8. Лариков Л.Н., Исайчев В.И. Диффузия в металлах и сплавах, – справочник, Киев: Наукова Думка, 1987. 509 с.
9. Физические величины. Справочник // под редакцией И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова – М.: Энергоиздат, 1991. 1232с.
10. Князева А.Г., Псахье С.Г. // Математическое моделирование систем и процессов. 2007. №15. с. 71-96.
11. Psakhie S.G., Knyazeva A.G. // Известие ВУЗов. Физика. Приложение. 2006. №8. Т.49. с.169–172.